

УДК 539.23; 539.216.1

## ИЗУЧЕНИЕ УПРАВЛЯЕМОСТИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ В СТРУКТУРАХ ТИПА «КВАНТОВАЯ ТОЧКА – КВАНТОВАЯ ЯМА» ИЛИ «КВАНТОВАЯ МОЛЕКУЛА»

**В. Ч. Жуковский, Ю. И. Дахновский<sup>\*</sup>, В. Д. Кревчик<sup>\*\*</sup>, М. Б. Семенов<sup>\*\*</sup>,  
В. Г. Майоров<sup>\*\*</sup>, Е. И. Кудряшов<sup>\*\*</sup>, К. Yamamoto<sup>\*\*\*</sup>**

(кафедра теоретической физики)

E-mail: zhukovsk@phys.msu.ru

**В рамках теории квантового туннелирования с диссипацией в инстантонном квазиклассическом приближении исследована управляемость туннелирования в системах «квантовая точка – квантовая яма» (КТ–КЯ) или «квантовая молекула». В качестве управляющих параметров рассматривались температура системы и соотношение размеров радиуса квантовой точки (КТ) и полуширины квантовой ямы, играющей роль контакта. Найдено условие блокировки одноэлектронной волновой функции в пределах КТ.**

В последние годы проблеме электронного транспорта в туннельно-связанных наноструктурах уделяется значительное внимание исследователей (см., напр., [1–6]). Научный и практический интерес к туннельным процессам обусловлен прежде всего высокой чувствительностью вероятности туннелирования к электронному энергетическому спектру, потенциалу конфайнмента системы и параметрам внешнего поля. Именно последнее обстоятельство дает дополнительную «степень свободы» для возможного управления свойствами туннельно-связанных наноструктур. В настоящей работе проводится оценка вероятности туннелирования (с точностью до экспоненты) в системах «квантовая точка (КТ) – квантовая яма (КЯ)» или «квантовая молекула» на основе теоретического подхода развитого в [5, 7, 8] с учетом роли спектра среды в одночастичном туннельном переносе. При этом предлагается рассматривать системы с КТ (как и макромолекулы) с позиций квантовой химической динамики. Продуктивность такого подхода обусловлена тем, что в пространстве наномасштабов физика и химия электронных процессов имеют много общего и появляется интересная возможность для изучения взаимодействия КТ с контактной средой в рамках науки о квантовом туннелировании с диссипацией [5, 9, 10]. Применимость квазиклассического инстантонного приближения [5, 7, 11] при исследовании температурной зависимости вероятности туннелирования  $\Gamma$  для КТ на основе InSb может быть оценена в квазиклассическом приближении из сравнения характерного размера системы с длиной волны де Бройля туннелирующей частицы или в рамках приближения разреженного газа пар «инстантон–антиинстантон» [5, 7, 8]:

$$\left\{ \begin{array}{l} R \gg \frac{\hbar}{(2 - \sqrt{3}) \sqrt{2m^*U_0}}, \\ R \gg \frac{\hbar}{\sqrt{8m^*k_B T}}. \end{array} \right. \quad (1)$$

В неравенстве (1) сравнивается радиус КТ  $R$  с длиной волны де Бройля туннелирующей частицы ( $U_0$  – высота барьера,  $m^*$  – эффективная масса туннелирующего электрона); формула (2) демонстрирует применимость приближения разреженного газа пар «инстантон–антиинстантон» [5, 7, 8]. Неравенства (1) и (2) выполняются одновременно при  $T \approx 50$  К и  $U_0 \approx 0.2$  эВ, что соответствует КТ на основе InSb.

Рассматриваются адиабатические туннельные реакции, у которых параметр Ландау–Зинера велик:  $\frac{\Delta^2}{\hbar u |F_2 - F_1|} \gg 1$ , где  $\Delta$  – электронный матричный элемент взаимодействия между начальным и конечным состояниями,  $u$  – скорость переносимой частицы,  $F_{1,2}$  – силы в точке пересечения термов [12]. Состояние реакционной системы в среде характеризуется многомерной потенциальной поверхностью (по аналогии с постановкой задачи в химической туннельной кинетике [5, 7, 8])

$$\begin{aligned} U_i &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \omega_{0i}^2 (x_i + x_{0i})^2, \\ U_f &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \omega_{0i}^2 (x_i - x_{0i})^2 - \Delta I. \end{aligned} \quad (3)$$

Гамильтониан системы (вдоль координаты туннелирования)

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2} + v_1(y_1) + y_1 \sum_{\alpha=2}^N C_{\alpha} y_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=2}^N (p_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 y_{\alpha}^2), \quad (4)$$

<sup>\*</sup>) Department of Physics & Astronomy, University of Wyoming, Laramie, WY, 82071, USA.

<sup>\*\*</sup>) Кафедра физики Пензенского государственного университета.

<sup>\*\*\*</sup>) Research Institute of International Medical Center, Japan.

где  $C_\alpha$  — коэффициенты взаимодействия с осцилляторными модами среды — термостата. Вероятность туннелирования в единицу времени [9, 10]

$$\Gamma = 2T \frac{\text{Im } Z}{\text{Re } Z}, \quad (5)$$

где

$$Z = \prod_\alpha \int Dy_1 \int Dy_\alpha \exp[-S\{y_1; y_\alpha\}] \quad (6)$$

— статистическая сумма системы, определяемая в виде континуального интеграла,  $y_\alpha(-\beta/2) = y_\alpha(\beta/2)$  (здесь  $\beta \equiv T^{-1}$  или  $\beta \equiv \frac{\hbar}{kT}$ , где  $\hbar$  и  $k$  полагаются равными единице). Квазиклассическое (инстантонное) действие [7, 9, 10]

$$S\{y_1\} = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \left[ \frac{1}{2} \dot{y}_1^2 + v(y_1) + \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' K(\tau - \tau') y_1(\tau) y_1(\tau') \right], \quad (7)$$

$$v(y_1) = v_1(y_1) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=2}^N \frac{C_\alpha^2}{\omega_\alpha^2} y_1^2, \quad (8)$$

$$\zeta_n = \nu_n^2 \sum_{\alpha=2}^N \frac{C_\alpha^2}{\omega_\alpha^2 (\omega_\alpha^2 + \nu_n^2)}, \quad (9)$$

Здесь  $\nu_n \equiv 2\pi nT$  — мацубаровская частота. Перенормированная потенциальная энергия частицы вдоль координаты туннелирования в случае двухъямной модели (рис. 1) принимает вид

$$v(q) = \frac{1}{2} \omega_0^2 (q + q_0)^2 \theta(-q) + \left[ \frac{1}{2} \omega_0^2 (q - q_1)^2 - \Delta I \right] \theta(q), \quad (10)$$

$$q = y_1 + \frac{\Delta I}{2\lambda}, \quad \omega_0^2 = \omega_1^2 - \sum_{\alpha=2}^N \frac{C_\alpha^2}{\omega_\alpha^2},$$

$$q_0 = \frac{\lambda}{\omega_0^2} - \frac{\Delta I}{2\lambda}, \quad q_1 = \frac{\lambda}{\omega_0^2} + \frac{\Delta I}{2\lambda}, \quad \lambda^2 = \sum_{i=1}^N \omega_{0i}^4 x_{0i}^2.$$

Предполагается, что в действие  $S(q)$  основной вклад вносит траектория (инстантон), минимизирующая функционал (7) и подчиняющаяся уравнению Эйлера–Лагранжа (причем траектория ищется на классе периодических функций)

$$-\ddot{q}_B(\tau) + \frac{\partial v(q_B)}{\partial q_B} + \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' K(\tau - \tau') q_B(\tau') = 0, \quad (11)$$

$$q_B(\tau) = q_B(\tau + \beta).$$

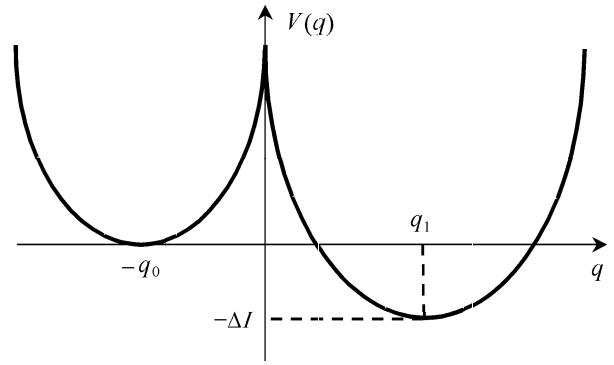


Рис. 1. Потенциальная энергия частицы вдоль координаты туннелирования (двухъямная модель)

Решение (11) ищем в виде

$$q_B(\tau) = \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} q_n \exp(i\nu_n \tau), \quad (12)$$

$$q_B(\tau) = -q_0 + \frac{2(q_0 + q_1)\tau_0}{\beta} + \frac{2\omega_0^2(q_1 + q_0)}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \nu_n \tau_0 \cdot \cos \nu_n \tau}{\nu_n (\nu_n^2 + \omega_0^2 + \zeta_n)}. \quad (13)$$

Тогда

$$S_B = 2\omega_0^2 (q_0 + q_1) q_0 \tau_0 - \frac{2\omega_0^2 (q_0 + q_1)^2 \tau_0^2}{\beta} - \frac{4\omega_0^4 (q_0 + q_1)^2}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2 \nu_n \tau_0}{\nu_n^2 (\nu_n^2 + \omega_0^2 + \zeta_n)}. \quad (14)$$

В случае взаимодействия с выделенной локальной модой (14) запишется в виде

$$2S = (q_1 + q_0)(3q_0 - q_1)\omega^2 \tau_0 - \frac{4\omega^2 (q_0 + q_1)^2 (\tau_0)^2}{\beta} - \frac{\omega^2 (q_0 + q_1)^2}{2\tilde{\gamma}} \left\{ \frac{\omega^2 - \tilde{x}_2}{\sqrt{\tilde{x}_1}} \left( \text{cth} \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\tilde{x}_1} \right) - \frac{1}{\text{sh} \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\tilde{x}_1} \right)} \left( \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \sqrt{\tilde{x}_1} \right] - \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} \right) \sqrt{\tilde{x}_1} \right] + \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \sqrt{\tilde{x}_1} \right] \right) \right) - \frac{\omega^2 - \tilde{x}_1}{\sqrt{\tilde{x}_2}} \left( \text{cth} \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\tilde{x}_2} \right) - \frac{1}{\text{sh} \left( \frac{\beta}{2} \sqrt{\tilde{x}_2} \right)} \left( \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \sqrt{\tilde{x}_2} \right] - \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} \right) \sqrt{\tilde{x}_2} \right] + \text{ch} \left[ \left( \frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \sqrt{\tilde{x}_2} \right] \right) \right) \right\}, \quad (15)$$

где

$$\tilde{x}_{1,2} = \frac{1}{2} \left( \omega^2 + \omega_L^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) \mp$$

$$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(\omega^2 + \omega_L^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right)^2 - 4\omega^2\omega_L^2},$$

$$\tilde{\gamma} = \sqrt{\left(\omega^2 + \omega_L^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right)^2 - 4\omega^2\omega_L^2}.$$

Та же формула (15) в боровских единицах принимает вид

$$S = \frac{1}{2} \frac{E_d}{\hbar} a_d^2 \varepsilon_0^{*2} l_1^2 \left( \frac{l_2}{2l_1} \tau_0^* - \tau_0^{*2} \varepsilon_T^* - \right.$$

$$- \frac{1}{2\gamma^*} \left\{ \frac{\varepsilon_0^{*2} - x_2^*}{\sqrt{x_1^*}} \left( \operatorname{cth} \left( \frac{\sqrt{x_1^*}}{2\varepsilon_T^*} \right) - \frac{1}{\operatorname{sh}(\sqrt{x_1^*}/2\varepsilon_T^*)} \right) \times \right.$$

$$\times \left( 2 \operatorname{ch} \left[ \left( \frac{1}{\varepsilon_T^*} - 2\tau_0^* \right) \frac{\sqrt{x_1^*}}{2} \right] - \operatorname{ch} \left[ \frac{\sqrt{x_1^*}}{2\varepsilon_T^*} \right] \right) \right\} -$$

$$- \frac{\varepsilon_0^{*2} - x_1^*}{\sqrt{x_2^*}} \left( \operatorname{cth} \left( \frac{\sqrt{x_2^*}}{2\varepsilon_T^*} \right) - \frac{1}{\operatorname{sh}(\sqrt{x_2^*}/2\varepsilon_T^*)} \right) \times$$

$$\times \left( 2 \operatorname{ch} \left[ \left( \frac{1}{\varepsilon_T^*} - 2\tau_0^* \right) \frac{\sqrt{x_2^*}}{2} \right] - \operatorname{ch} \left[ \frac{\sqrt{x_2^*}}{2\varepsilon_T^*} \right] \right) \right\}, \quad (16)$$

где

$$x_{1,2}^* = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_0^{*2} + \varepsilon_L^{*2} + \frac{\gamma_0^*}{\varepsilon_L^{*2}} \right) \mp$$

$$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\left( \varepsilon_0^{*2} + \varepsilon_L^{*2} + \frac{\gamma_0^*}{\varepsilon_L^{*2}} \right)^2 - 4\varepsilon_0^{*2}\varepsilon_L^{*2}},$$

$$\tilde{\gamma} = \sqrt{\left( \varepsilon_0^{*2} + \varepsilon_L^{*2} + \frac{\gamma_0^*}{\varepsilon_L^{*2}} \right)^2 - 4\varepsilon_0^{*2}\varepsilon_L^{*2}},$$

$$\tau_0^* = \frac{1}{\varepsilon_0^*} \operatorname{Arcsh} \left[ \frac{a^* - b^*}{a^* + b^*} \operatorname{sh} \frac{\varepsilon_0^*}{2\varepsilon_T^*} \right] + \frac{1}{2\varepsilon_T^*},$$

$$\varepsilon_T^* = \frac{\hbar}{\beta E_d}, \quad \varepsilon_L^* = \frac{\hbar \omega_L}{E_d}, \quad \beta = \frac{\hbar}{\varepsilon_T^* E_d}, \quad \varepsilon_T^{*2} = \frac{4U_0^*}{q_0^{*2}},$$

$$U_0^* = \frac{U_0}{E_d}, \quad l_1 = a^* + b^*, \quad l_2 = 3a^* - b^*,$$

$$a^* = \frac{q_0}{a_d}, \quad b^* = \frac{q_1}{a_d}, \quad \gamma_0^* = \frac{\hbar^4 C^2}{E_d^4}, \quad \frac{q_1}{q_0} = \frac{b^*}{a^*} = \frac{b}{a}.$$

Результаты исследования температурной зависимости вероятности туннелирования  $\Gamma$  для КТ на основе InSb представлены на рис. 2. Вероятность туннелирования чувствительна к частоте фоновой моды и к константе взаимодействия с контактной средой (рис. 3, 4). С точки зрения физики процесса результаты вполне ожидаемы: с ростом частоты фоновой моды увеличивается эффективность электрон-фононного взаимодействия, что сопровождается соответствующим ростом энергии туннелирующего электрона и приводит к росту вероятности туннельного переноса (переход от кривых 1 к кривым 2 на рис. 3, 4); возрастание константы взаимодействия приводит к увеличению вязкости контактной среды,

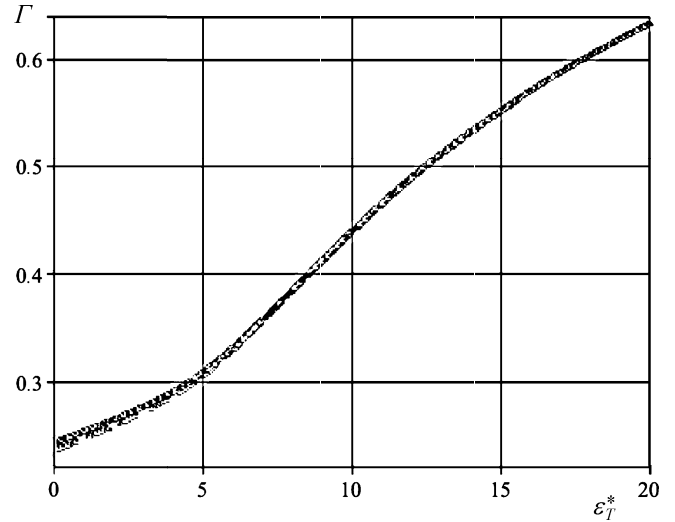


Рис. 2. Зависимость  $\Gamma$  от величины  $\varepsilon_T^*$  для КТ на основе InSb

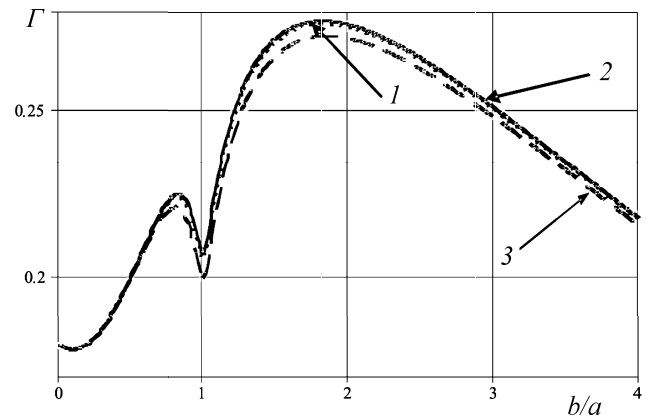


Рис. 3. Зависимость  $\Gamma$  от величины параметра асимметрии  $b/a$  для системы «КТ - объемный контакт» (на основе InSb): 1 -  $U_0^* = 200$ ,  $\varepsilon_T^* = 3$ ,  $\varepsilon_L^* = 1$ ,  $\gamma_0^* = 10$ ; 2 -  $U_0^* = 200$ ,  $\varepsilon_T^* = 3$ ,  $\varepsilon_L^* = 10$ ,  $\gamma_0^* = 10$ ; 3 -  $U_0^* = 200$ ,  $\varepsilon_T^* = 3$ ,  $\varepsilon_L^* = 1$ ,  $\gamma_0^* = 50$

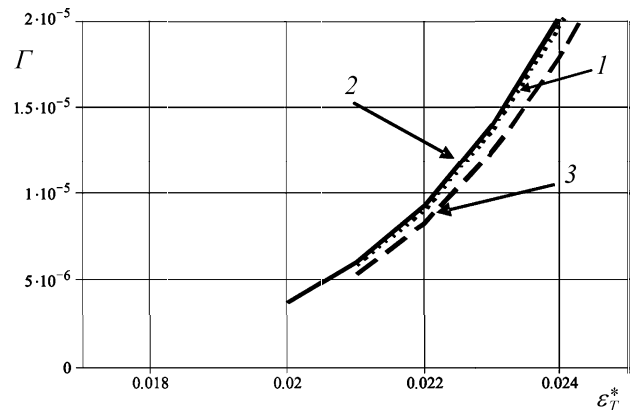


Рис. 4. Зависимость  $\Gamma$  от величины  $\varepsilon_T^*$  для системы «КТ - объемный контакт» (на основе InSb) при  $b/a < 1$ : 1 -  $U_0^* = 200$ ,  $b/a = 0.98$ ,  $\varepsilon_L^* = 1$ ,  $\gamma_0^* = 10$ ; 2 -  $U_0^* = 200$ ,  $b/a = 0.98$ ,  $\varepsilon_L^* = 10$ ,  $\gamma_0^* = 10$ ; 3 -  $U_0^* = 200$ ,  $b/a = 0.98$ ,  $\varepsilon_L^* = 1$ ,  $\gamma_0^* = 50$

т. е. к росту ее «степени диссипативности» и соответствующему уменьшению вероятности туннельного переноса (переход от кривых 1 к кривым 3 на рис. 3, 4). Рис. 3 демонстрирует ряд интересных

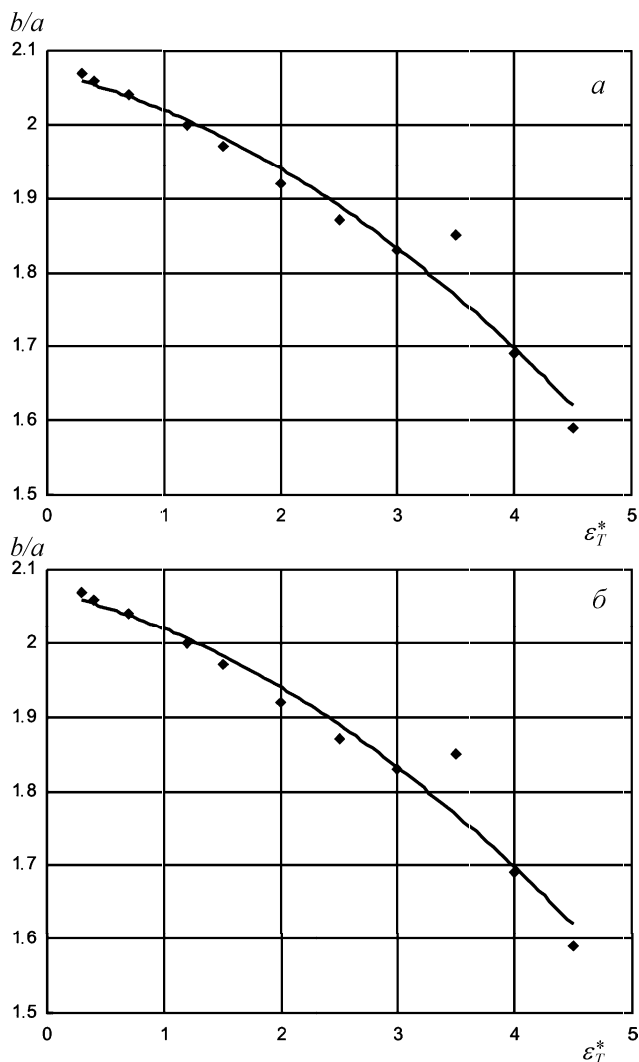


Рис. 5. Зависимость экстремального значения  $b/a$  от  $\varepsilon_T^*$  при  $b/a > 1$  (а) и  $b/a < 1$  (б)

особенностей туннелирования в системах «КТ–КЯ». Во-первых, при совпадении радиуса КТ с полушириной КЯ, выполняющей роль контакта, наблюдается эффект блокировки одноэлектронной волновой функции в пределах КТ (характерный минимум на рис. 3). Интерес к такому эффекту существенно возрос в последнее время в связи с изучением динамического контроля электронных состояний в двойной КТ в условиях слабой диссипации [6]. Кроме того, на рис. 3 представлены характерные температурно-управляемые максимумы в вероятности туннельного переноса при следующих услови-

ях: а) радиус КТ больше полуширины КЯ (левый максимум) и б) радиус КТ меньше полуширины КЯ (правый максимум). Линейная динамика термоуправляемости правого максимума и нелинейная левого представлена на рис. 5. Рис. 4 демонстрирует пороговый характер термоуправляемого туннелирования в системах «КТ–КЯ», когда радиус КТ больше полуширины КЯ. Также показано, что в случае распадного потенциала конфайнмента наблюдается монотонное уменьшение вероятности туннелирования  $\Gamma$  с ростом размера КТ.

Таким образом, продемонстрирована возможность использования теории квантового туннелирования с диссипацией к изучению термоуправляемости туннелирования в структурах с квантовыми точками.

#### Литература

1. Gorokhov D.A., da Silveira Rava A. <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308023>.
2. Foa Torres L.E.F., Lewenkopf C.H., Pastawski H.M. <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0306148>.
3. Thielmann A., Hettler M.H., König J., Schön G. // Phys. Rev. B. 2003. **68**. P. 115105 (<http://arXiv.org/abs/cond-mat/0302621>).
4. Ханин Ю.Н., Вдовин Е.Е., Дубровский Ю.В. // Физика и техника полупроводников. 2004. **38**, № 4. С. 436.
5. Овчинников А.А., Дахновский Ю.И., Кривчик В.Д. и др. Принципы управляемой модуляции низкоразмерных структур. М., 2003.
6. Бурдов В.А., Соленов Д.С. // ЖЭТФ. 2004. **125**, № 3. С. 684.
7. Дахновский Ю.И., Овчинников А.А., Семенов М.Б. // ЖЭТФ. 1987. **92**, № 3. С. 955.
8. Aringazin A.K., Dahnovsky Yu.I., Krevchik V.D. и др. // Phys. Rev. B. 2003. **68**. P. 155426-1.
9. Caldeira A.O., Leggett A.J. // Phys. Rev. Lett. 1981. **46**, N 4. P. 211.
10. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. // Письма в ЖЭТФ. 1983. **37**, № 7. С. 322.
11. Тернов И.М., Жуковский В.Ч., Борисов А.В. Квантовая механика и макроскопические эффекты. М., 1993.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., 1989.

Поступила в редакцию  
01.07.05